12. 一次元液体格子内の電子スペクトル

芝浦工大　　広 田　　徹

§ 序

Random 格子内の一電子スペクトルを求める近似的方法として，次の3つを挙げる事が出来る。

- Green 函数法
- Average Eigenvalue Equation 法
- moment method

2番目の Averaged Eigenvalue Equation 法は，Random chain の Tranfer matrix の trace が2に等しいという結果を使う。（即ち＜ T_r T_N ＞＝2）3番目の moment method は固有値方程式を使用する。所で積分方程式の iteration series を平均操作を行なって無限次迄全部 Sum up して平均解を求める方法は Averaged Eigenvalue eq．法及び Green 函数法と関聯している。一般に積分方程式には Volterra 形式のものと Fredholm 形式のものとがあるが，一次元の Schrödinger eq．を Volterra 形式に書くと tranfer matrix と同種のものになる。又，Fredholm 形式に書くと，その iteration series は，Green 函数法に於て，自由電子のプロパゲーターを使用した場合の一体 Green 函数の展開式に対応する。Volterra の場合でも Fredholm の場合でも，その iteration series は自由電子の多体散乱の形で表わされて居り，液体格子の場合には long range のグリーン函数により無限次迄足し合わす事が必要であるように思われる。一次元 chain の場合 Volterra 形式の方が足し合せるのに便利であり，Volterra から出発したわけである。格子間隔が変化する場合でも，周期性からの辷りが小である場合には辷りの大きさにより変化する energyg ap が見出され，又不連続的に変化する Random 合金様のものである場合には Saxon Hutner 定理が確かめられる。

§ 1．連続分布の時の energy gap．

方法については，物性 Vol．8，No．2，p．119～126，（1967）に書いて

あるので，それを参考にして戴く事にし，ここでは付け加えたものを書いてみよう。

一定の強さη_0のδ函数ポテンシャルが，一直線上に分布している液体格子内の一電子状態を考える。隣り合っているポテンシャル間の距離が分布函数 f(t) により変化するとすると，スペクトルは，

$$\cos(\xi+i\eta)=\frac{1}{2\sqrt{h_+h_-}}\left\{h_++h_-+\frac{k_0}{2ik}(h_+-h_-)\right\} \quad \cdots (1)$$

の式より，両辺の Real part と Imaginary part をとり，その二つの式より変数Pを消去することにより得られる。但し，ξは波数，η及び$h_\pm$は

$$\eta=-\frac{1}{2}\log(h_+h_-) \quad \cdots (2)$$

$$h_\pm=h_\pm(p)=\int dt\, e^{i(\pm k+p)t}f(t) \quad \cdots (3)$$

によって与えられる。f(t)としてGaussian分布

$$f(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(t-a)^2}{2\sigma^2}} \quad \cdots (4)$$

をとるならば，band edge 附近のスペクトルは，

$$\cos^2\xi=\frac{1+\dfrac{\sinh^2\frac{\sigma^2k^2}{2}}{\sin^2(ka+\beta)/\cos^2\beta}}{\dfrac{\cosh^2\frac{\sigma^2k^2}{2}}{\cos^2(ka+\beta)/\cos^2\beta}+\dfrac{\sinh^2\frac{\sigma^2k^2}{2}}{\sin^2(ka+\beta)/\cos^2\beta}} \quad \cdots (5)$$

によって決まる。但し

$$\tan\beta=-\frac{k_0}{2k} \quad \cdots (6)$$

前に説明したように，band の edge は$\xi=n\pi$（$n=0, \pm1, \cdots\cdots$），P＝0により与えられる。従って，(1)より$h_\pm$（P＝0）を使い

$$\frac{1}{2}\left\{\sqrt{h_+h_-}+\frac{1}{\sqrt{h_+h_-}}\right\} \gtreqless \frac{1}{2\sqrt{h_+h_-}}\left\{(h_+ + h_-)+\frac{k_0}{2ik}(h_+ - h_-)\right\} \quad \cdots (7)$$

が得られる。上式の上の不等号は，エネルギーパラメーターkがband内にある場合であり，等号はband edgeを表わし，下の不等号はkがenergy gap内にある事を示している。分布函数f(t)がt＝aの廻りに対称であるとして

$$h_{\pm}(P=0) = e^{\pm ika}D(k) \quad \cdots (8)$$

と置くとD(k)はkの実函数である。(8)を(7)に代入すると

$$\frac{1}{2}\left\{D(k)+\frac{1}{D(k)}\right\} \gtreqless \left|\cos ka+\frac{k_0}{2k}\sin ka\right| = \left|\frac{\cos(ka+\beta)}{\cos\beta}\right| \quad \cdots (9)$$

となる。従ってGapのPersistenceの条件は

$$\frac{1}{2}\left\{D(k)+\frac{1}{D(k)}\right\} < \left|\frac{1}{\cos\beta}\right| \quad \cdots (10)$$

となる。(9)，(10)の左辺は常に1以上である。

種々の分布に対し，D(k)を求めると

(1)　Gaussian　$D(k) = e^{-\frac{\sigma^2k^2}{2}}$ $\quad \cdots (11)$

(2)　$\frac{\delta}{2}e^{-\delta|t-a|}$　$D(k) = \frac{\delta^2}{\delta^2+k^2}$ $\quad \cdots (12)$

(3)　$f(t)\begin{cases} = 2b & t=a+c\sim a-c \\ = 0 & \text{else where}\end{cases}$　$D(k) = \frac{\sin kC}{kC}$ $\quad \cdots (13)$

(4)　$f(t)\begin{cases} = \left(\frac{3\times 5^{\frac{1}{2}}}{20\sigma}\right)\left[1-\frac{(t-a)^2}{5\sigma^2}\right] & a-5^{\frac{1}{2}}\sigma < t < a+5^{\frac{1}{2}}\sigma \\ = 0 & \text{else where}\end{cases}$

$$D(k) = 3\left\{\frac{\sin(k\sigma 5^{\frac{1}{2}})}{(k\sigma 5^{\frac{1}{2}})^3} - \frac{\cos(k\sigma 5^{\frac{1}{2}})}{(k\sigma 5^{\frac{1}{2}})^2}\right\} \qquad \cdots (14)$$

(cut off Parabolic)

となる。このD(k)と(9)の式より，種々の分布の場合のGapの形が得られるのであるが，ここでは，Borland & Bird (Proc. Phys. Soc. 88 23) 及 Makinson & Roberts (Aust. J. Phys. 13 437) が Functional eq. の方法より数値計算を行ない Gap の Persistence を調べた結果と比較してみよう。分布函数は彼等の使った分布と同じもの (Borland & Bird は前述の分布(3)，Makinson & Roberts は分布(4)) を使うが，Gap の Persistence の式を導いた方法には，一定範囲のポテンシャル数を一定とする制限 (一種の長距離相関) が入って居り，f(t) が同じでも全体の分布は異なる点を指摘しておかなければいけない。この制限の為(10)からの結果が，数値計算の結果よりGapが消え失せにくいという傾向に導いたとしても，直ちに近似の良否にむすびつける事は出来ない。

Borland. Bird の場合 ($k_0 a = 0.8$)

$$\sigma = 3^{-\frac{1}{2}}\frac{c}{a}$$

		0.04	0.08	0.09
k ↓	1st gap	exist	vanish	
		(exist)	(exist)	(vanish)
	2nd gap	vanish	vanish	
		(vanish)	(vanish)	

Makinson. Roberts の場合 ($k_0 a = 0.25$)

σ

	0.25	0.05	0.07
1st gap	exist	Vanish	
	(exist)	(exist)	(vanish)

但し上の括弧内は(10)よりの結果である。明らかにgapが数値計算の場合より消えにくい事を示している。

連続分布の場合，周期格子からの辷りが小さいならば $D(k) \simeq 1$，であり分布の如何に拘らず，energy gapが存在することが(10)より結論される。

§　不連続分布の場合（Saxon Hutner定理）

Saxon & Hutnerは，一次元不純物準位に関する論文　（Philips Rep 4 81 (1949)）内で，二種類の原子A,Bがrandomに入れまじった合金内に於てpure A系での禁止帯とpure B系での禁止帯が重なって居り，共通の禁止帯が存在するならば，AとBとの混合系に於ても禁止帯であろうとのconjectureをなした。これはSaxon Hutner定理と呼ばれ，いろいろ拡張した意味で使われるようになり，random系を調べる重要な手掛りになっている。堀・松田・戸田らにより，一次元のみではなく，多次元の場合成立するか否かについて調べられている。

ここでは，ポテンシャル間隔が不連続な値を持つ系に対し，Gapをみてみよう。不連続分布は

$$f(t) = \sum_i \alpha_i \delta(t - a_i) \qquad i : \text{species} \qquad \cdots (15)$$

で与えられるものとする。α_i は間隔が a_i なる場合の割合である。従って，

$$\sum_i \alpha_i = 1 \qquad \cdots (16)$$

$$\begin{aligned} h_\pm (P=0) &= \int e^{\pm ikt} f(t)\,dt \\ &= \sum \alpha_i e^{\pm ika_i} \end{aligned} \qquad \cdots (17)$$

これを(7)に代入すると，Gapの条件として

$$\left| 1-\sum_{i>j} \alpha_i \alpha_j \left(1-\cos k \left(a_i - a_j \right) \right) \right| < \left| \sum_i \alpha_i \left(\cos k a_i + \frac{k_0}{2k} \sin k a_i \right) \right| \quad \cdots (18)$$

が得られる。kが格子間隔 a_i を持つ周期格子の一つのGap内にあるならば，

$$\left| \cos k a_i + \frac{k_0}{2k} \sin k a_i \right| > 1 \quad \cdots (19)$$

が成立する。すべての a_i に対し上式が成立するならば，更に絶対値内の符号が同じとすると，不等式(18)は成立する。これは Saxon Hutner 定理に外ならない。